

MECHANIKA KWANTOWA II B

Ćw. #5

6.11.2018

① Kwantowanie drgań struny

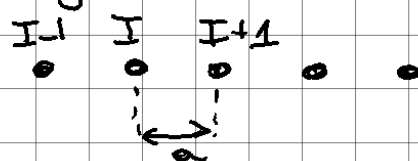
Przeprowadzić procedurę kwantowania drgań jednowymiarowego łańcucha harmonicznego składającego się z N węzłów oddzielonych od siebie o a . Przyjąć periodyczne warunki brzegowe. Problem rozwiązać poprzez wykonanie granicy ciągłej, która pozwoli zapisać to zagadnienie w języku klasycznej teorii pola. Zapisać odpowiedni lagrangian układu i znaleźć równania ruchu dla tego układu. Następnie wykonując transformację Legendre'a znaleźć hamiltonian tego układu. Nałożając relacje komutacyjne na pędy i potężnia uogólnione wykonać kwantowanie problemu i przepisz

hamiltonian w postaci Π kwantyzacji.
Co możemy powiedzieć o naturze
wzbużeń elementarnych w tym problemie?

Rozwiązanie:

W $T=0$ będziemy jony traktować
klasycznie i przyjmujemy, że tworzą
one sieć krystaliczną w której
średnie położenie jonów wynosi:

$$R_I \equiv I a = \bar{R}_I$$



każde wychylenie od tego stanu kosztuje
energii potencjalną. W niskich temp.
wychylenia są małe, a wtedy drgania
powinny być harmoniczne.

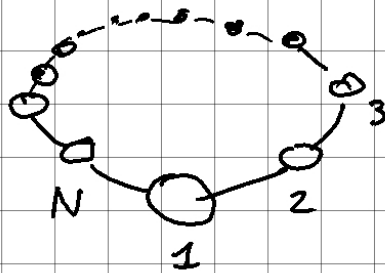
Zatem hamiltonianiskoenergetyczny jest

postaci:

$$H = \sum_{I=1}^N \left[\frac{P_I^2}{2M} + \frac{k_s}{2} (R_{I+1} - R_I - a)^2 \right]$$

Przyjmujemy periodyczne
warunki brzegowe,

$$t.j. \quad R_1 \equiv R_{N+1}$$



Naszym celem będzie przyjrzenie się
wzbrojeniu elementarnemu w teorii
kwantowej.

Zaczniemy od przepisania tego problemu
jako klasycznej teorii pola.

Z powyższym hamiltonianem

stworzyszony jest lagrangian:

$$L = T - V = \sum_{I=1}^N \left[\frac{M \dot{R}_I^2}{2} - \frac{k_s}{2} (R_{I+1} - R_I - a)^2 \right]$$

Ponadto $R_{I+1} - R_I - a \ll a$ - małe drgania

$$R_I(t) = \bar{R}_I + \phi_I(t) \quad , \quad \phi_{N+1} = \phi_1$$

↑ wychylenie z położenia
równowagi



wtedy

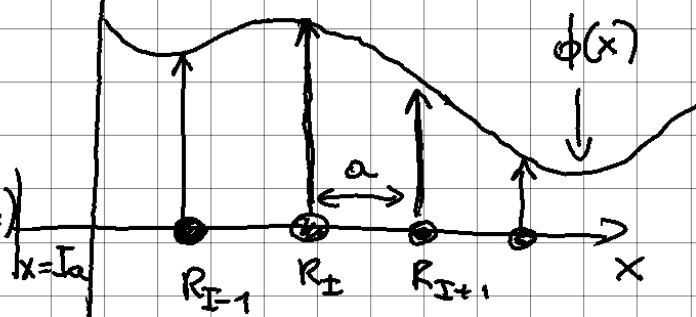
$$L = \sum_{I=1}^N \left[\frac{M}{2} \dot{\phi}_I^2 - \frac{k_s}{2} (\phi_{I+1} - \phi_I)^2 \right]$$

Interesuje nas makroskopowe zachowanie takiego kryształu, tj. $N \approx 10^{23} \gg 1!$,

dlatego będziemy chcieli przejść do granicy ciągłej:

$$\{\Phi_I\} \rightarrow \phi(x)$$

$$\left. \begin{aligned} [\Phi_I] &= L \\ [\phi(x)] &= \sqrt{L} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \phi_I \rightarrow \sqrt{a} \phi(x)$$



Gdy „ $a \rightarrow 0$ ”, wtedy dostajemy granicę ciągłą (fizycznie: $a \ll$ charakterystycznej skali zmienności $\phi \rightarrow$ granica nieskończonej).

$$\phi_{I+1} = \phi_I + \frac{\Phi_{I+1} - \Phi_I}{a} \cdot a$$

$$\Phi_{I+1} - \Phi_I \longrightarrow \frac{\phi(x+a) - \phi(x)}{a} a^{3/2} \xrightarrow["a \rightarrow 0"]{L=Na} \left(\partial_x \phi \right) \Big|_{x=Ia} a^{3/2}$$

$$\sum_{I=1}^N f(I) = \frac{1}{a} \sum_{I=1}^N a f(I) \xrightarrow["a \rightarrow 0"]{\text{suma Riemanna}} \frac{1}{a} \int_0^L dx f(x)$$

obstawiamy funkcjonal - Lagrangian:

$$L[\phi] = \frac{1}{a} \int_0^L dx \left[\frac{Ma}{2} (\dot{\phi}(x))^2 - \frac{k_s}{2} (\partial_x \phi)^2 a^3 \right] =$$
$$= \int_0^L \underbrace{\left\{ \frac{M}{2} (\dot{\phi}(x))^2 - \frac{k_s a^2}{2} (\partial_x \phi)^2 \right\}}_{\mathcal{L}[\phi, \partial_x \phi, \dot{\phi}]}$$

$\mathcal{L}[\phi, \partial_x \phi, \dot{\phi}]$ - gęstość lagrangianu

$$[\mathcal{L}] = \frac{E}{L}$$

Klasyczne drżenie:

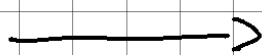
$$S[\phi] = \int dt L[\phi] = \int dt \int dx \mathcal{L}[\phi, \partial_x \phi, \dot{\phi}]$$

Dyskretne położenia

janów

$$I = 1, 2, \dots, N$$

łańcuch



Klasyczne pole
wychyleń $\phi(x)$

Struna

$S[\phi] \in \mathbb{R}$ - funkcjonal

Skąd się wziął?

$\phi(x)$ - ciągłe przybliżenie wektora $\{\phi\} \in \mathbb{R}^N$

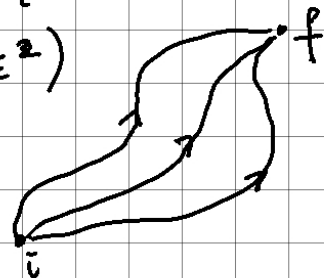
$L[\phi]$ - ciągłe przybliżenie funkcji od wektora

$$L: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$$

Równania ruchu:

Stosujemy zasadę najmniejszego działania: $\phi(x,t) \mapsto \phi(x,t) + \varepsilon \eta(x,t)$

$$\delta S = S[\phi + \varepsilon \eta] - S[\phi] = 0 + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$



$$\begin{aligned} S[\phi + \varepsilon \eta] &= S[\phi] + \\ &+ \varepsilon \int_0^L dx \int_0^t dt' [M \dot{\phi} \dot{\eta} - k_s a^2 (\partial_x \phi) (\partial_x \eta)] + \mathcal{O}(\varepsilon^2) = \\ &= S[\phi] + \varepsilon \int_0^L dx \left[M \dot{\phi} \eta \Big|_0^t - \int_0^t dt' M \ddot{\phi} \eta \right] + \\ &\quad - \varepsilon k_s a^2 \int_0^t dt' \left[(\partial_x \phi) \eta \Big|_0^L - \int_0^L dx (\partial_x^2 \phi) \eta \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{S[\phi + \varepsilon \eta] - S[\phi]}{\varepsilon} = - \int_0^t dt' \int_0^L dx [M \ddot{\phi} - k_s a^2 \partial_x^2 \phi] \eta = 0, \forall \eta$$

zatem

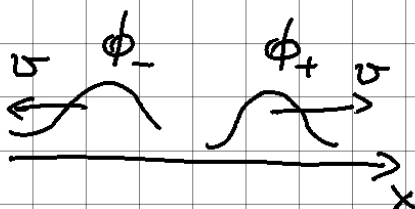
$$[M \partial_t^2 - k_s a^2 \partial_x^2] \phi = 0$$

równanie fali

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - v \frac{\partial}{\partial x} \right] \left[\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right] \phi = 0$$

$$\Rightarrow (\partial_t - v \partial_x) \phi = 0, \quad (\partial_t + v \partial_x) \phi = 0$$

Rozwiązania równania fobowego
są więc postaci

$$\phi(x,t) = \phi_+(x-vt) + \phi_-(x+vt)$$


$$\partial_t^2 \phi_+(x-vt) = -v \partial_t \phi'_+(x-vt) = +v^2 \phi''_+(x-vt)$$

$$\Rightarrow M v^2 = k_s a^2, \text{ czyli } v = \sqrt{\frac{k_s}{M}} a - \text{prędkość dźwięku}$$

Fale dźwiękowe propagujące się

z prędkością v są naszymi
wzburzeniami elementarnymi.

Gęstość hamiltonianu - energii: $(H = \int_0^L dx \mathcal{H})$

Pedy kanonicznie sprzężone:

$$\pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}[\phi, \partial_x \phi, \dot{\phi}]}{\partial \dot{\phi}} = M \dot{\phi}(x) \rightarrow \dot{\phi}(x) = \frac{1}{M} \pi(x)$$

Transformacja Legendre'a:

$$\mathcal{H}[\phi, \partial_x \phi, \pi] \equiv \left(\pi \dot{\phi} - \mathcal{L}[\phi, \partial_x \phi, \dot{\phi}] \right) \Big|_{\dot{\phi} = \dot{\phi}(\phi, \pi)} =$$

$$= \frac{\pi^2}{M} - \frac{M}{2} \frac{\pi^2}{M} + \frac{k_s a^2}{2} (\partial_x \phi)^2 = \frac{\pi^2}{2M} + \frac{k_s a^2}{2} (\partial_x \phi)^2$$

Kwantowanie kanoniczne pól

Jak skwantować nasz model dany przez $L[\phi] = \int_0^L dx \mathcal{L}[\phi, \partial_x \phi, \dot{\phi}]$?

Pamiętajcie:

Nawias Poissona

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^s \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$$

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{H, A\}$$

Jak wygląda nawias Poissona dla pól $\pi(x)$ i $\phi(x)$? $\leftarrow$ pochodna funkcyjna

$$\begin{aligned} \{\phi(x), \pi(x')\} &= \int dx'' \left(\underbrace{\frac{\delta \phi(x)}{\delta \phi(x'')}}_{\delta(x-x'')} \underbrace{\frac{\delta \pi(x')}{\delta \pi(x'')}}_{\delta(x'-x'')} - \underbrace{\frac{\delta \phi(x)}{\delta \pi(x'')}}_{0} \underbrace{\frac{\delta \pi(x')}{\delta \phi(x'')}}_{0} \right) \\ &= \int dx'' \delta(x-x'') \delta(x'-x'') = \delta(x-x') \end{aligned}$$

Uogólniamy procedurę kwantowania na

przypadku ciał q, p :

$$\phi(x) \rightarrow \hat{\phi}(x)$$

$$\pi(x) \rightarrow \hat{\pi}(x)$$

pole zastępujemy
odpowiednimi operatorami

i namierzamy na nie relacje komutacyjne (dla bozonów):

$$[\hat{\phi}(x), \hat{\pi}(x')] = i\hbar \delta(x-x')$$

Klasyczna gęstość hamiltonianu staje się operatorem kwantowym:

$$\hat{H}[\hat{\phi}, \hat{\pi}] = \int dx \left[\frac{\hat{\pi}^2}{2M} + \frac{k_s a^2}{2} (\partial_x \hat{\phi})^2 \right]$$

$\mathcal{H}[\hat{\phi}, \hat{\pi}]$

$$\Rightarrow \mathcal{H}[\hat{\phi}, \hat{\pi}] = \frac{1}{2M} \hat{\pi}^2 + \frac{k_s a^2}{2} (\partial_x \hat{\phi})^2$$

Możemy wykorzystać transformację

Fouriera:

$$\hat{\phi}_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_0^L dx e^{-ikx} \hat{\phi}(x), \quad \hat{\phi}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} \hat{\phi}_k$$

$$\hat{\pi}_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_0^L dx e^{ikx} \hat{\pi}(x), \quad \hat{\pi}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{-ikx} \hat{\pi}_k,$$

gdzie $k = \frac{2\pi n}{L}, n \in \mathbb{Z}$ (PBC)

$$\left. \begin{aligned} \hat{\phi}_k &= \hat{\phi}_{-k}^\dagger \\ \hat{\pi}_k &= \hat{\pi}_{-k}^\dagger \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\leftarrow \text{hermitowskie pola kwantowe} \\ &\text{b. } \left. \begin{aligned} \phi(x) \\ \pi(x) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\text{niezwiązane} \\ &\text{pola klasyczne} \end{aligned} \end{aligned}$$

Ile wynosi $[\hat{\phi}_k, \hat{\pi}_{k'}]$?

$$[\hat{\phi}_k, \hat{\pi}_{k'}] = \frac{1}{L} \int dx_1 \int dx_2 e^{-ikx_1} e^{ik'x_2} [\hat{\phi}(x_1), \hat{\pi}(x_2)] =$$

$$= \frac{i\hbar}{L} \underbrace{\int dx_1 e^{i(k'-k)x_1}}_{L \delta_{kk'}} = i\hbar \delta_{kk'}$$

wyli $[\hat{\phi}_k, \hat{\pi}_{k'}] = i\hbar \delta_{kk'}$

Przepiszmy teraz hamiltonian wykorzystując

operatory $\hat{\pi}_k$ i $\hat{\phi}_k$:

$$\bullet \int dx (\partial_x \hat{\phi})^2 = \int dx \left(\partial_x \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k_1} e^{ik_1 x} \hat{\phi}_{k_1} \right) \left(\partial_x \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k_2} e^{ik_2 x} \hat{\phi}_{k_2} \right) =$$

$$= \sum_{k_1, k_2} (-k_1 k_2) \hat{\phi}_{k_1} \hat{\phi}_{k_2} \underbrace{\int dx \frac{1}{L} e^{i(k_1+k_2)x}}_{\delta_{k_1, -k_2}} = \sum_k k^2 \hat{\phi}_k \hat{\phi}_{-k}$$

$$\bullet \int dx \hat{\pi}^2(x) = \int dx \left(\sum_{k_1} e^{-ik_1 x} \frac{1}{\sqrt{L}} \hat{\pi}_{k_1} \right) \left(\sum_{k_2} e^{-ik_2 x} \frac{1}{\sqrt{L}} \hat{\pi}_{k_2} \right) =$$

$$= \sum_k \hat{\pi}_k \hat{\pi}_{-k}$$

$$\hat{H} = \sum_k \left[\frac{1}{2M} \hat{\pi}_k \hat{\pi}_{-k} + \frac{k_s^2 a^2}{2} k^2 \hat{\phi}_k \hat{\phi}_{-k} \right]$$

ponadto wprowadzamy oznaczenie

$$\omega_k = v|k|, \quad \text{gdzie } v = a\sqrt{\frac{k_3}{M}},$$

wtedy

$$\hat{H} = \sum_k \left[\frac{M}{2} \hat{\pi}_k \hat{\pi}_{-k} + \frac{M\omega_k^2}{2} \hat{\phi}_k \hat{\phi}_{-k} \right]$$

wyrażenie to przypomina sumę po jednowymiarowych oscylatorach harmoniczych.

Przez analogię do jednowymiarowego oscylatora harmonicznego wprowadzamy operatory:

$$\hat{a}_k = \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}} \left(\hat{\phi}_k + \frac{i}{m\omega_k} \hat{\pi}_{-k} \right)$$

$$\hat{a}_k^+ = \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}} \left(\hat{\phi}_{-k} - \frac{i}{m\omega_k} \hat{\pi}_k \right)$$

Relacje komutacyjne dla $\hat{a}_k$ i $\hat{a}_k^+$:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] &= \sqrt{\dots} \sqrt{\dots} \left([\hat{\phi}_k, \hat{\phi}_{k'}] + \frac{i}{m\omega_{k'}} [\hat{\phi}_k, \hat{\pi}_{-k'}] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{i}{m\omega_k} [\hat{\pi}_{-k}, \hat{\phi}_{k'}] - \frac{1}{M\omega_k\omega_{k'}} [\hat{\pi}_{-k}, \hat{\pi}_{-k'}] \right) = \end{aligned}$$

$$= \sqrt{\dots} \sqrt{\dots} \left(\frac{i}{m\omega_k} \delta_{k,-k'} - \frac{i}{m\omega_{-k}} \delta_{-k,k'} \right) = 0, \forall k, k'$$

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \frac{M}{2\hbar} \sqrt{\omega_k \omega_{k'}} \left(-\frac{i}{m\omega_{k'}} \underbrace{\left[\hat{\phi}_k, \hat{\pi}_{k'} \right]}_{i\hbar \delta_{kk'}} + \frac{i}{m\omega_k} \underbrace{\left[\hat{\pi}_{-k}, \hat{\phi}_{-k'} \right]}_{-i\hbar \delta_{kk'}} \right) = \delta_{kk}$$

Hamiltonian: $\{ \omega_k = \omega_{-k} \}$

$$\hat{\phi}_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} (\hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger), \quad \hat{\pi}_k = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega_k}{2}} (\hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_{-k})$$

$$\bullet \sum_k \frac{1}{2M} \hat{\pi}_k \hat{\pi}_{-k} = \sum_k \frac{1}{2M} \frac{-\hbar M \omega_k}{2} (\hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_{-k}) (\hat{a}_{-k}^\dagger - \hat{a}_k) =$$

$$= -\frac{1}{4} \sum_k \hbar \omega_k \left[\underbrace{\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger}_{\substack{\leftarrow \\ +}} - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k - \hat{a}_{-k} \hat{a}_{-k}^\dagger + \underbrace{\hat{a}_{-k} \hat{a}_k}_{\substack{\leftarrow \\ +}} \right]$$

$$\bullet \sum_k \frac{m\omega_k^2}{2} \hat{\phi}_k \hat{\phi}_{-k} = \sum_k \frac{m\omega_k^2}{2} \frac{\hbar}{2m\omega_k} (\hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger) (\hat{a}_{-k} + \hat{a}_k^\dagger) =$$

$$= \frac{1}{4} \sum_k \hbar \omega_k (\hat{a}_k \hat{a}_{-k} + \hat{a}_k \hat{a}_{-k}^\dagger + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_k)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_n \hbar \omega_n [a_n^\dagger a_n + a_n a_n^\dagger] =$$

$\nearrow$
 $a_n^\dagger a_n + 1$

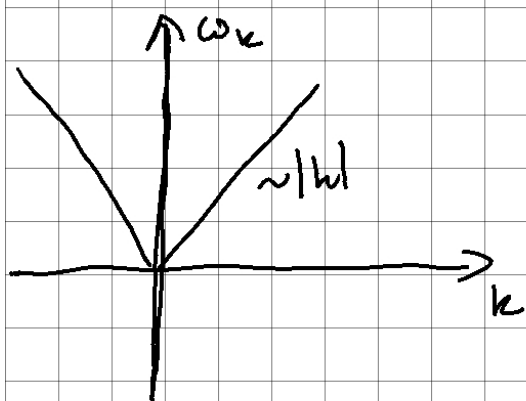
$$= \sum_n \hbar \omega_n \left(a_n^\dagger a_n + \frac{1}{2} \right)$$

swobodny hamiltonian fononowy
w reprezentacji II kwantyzacji

Stan wzbudzony jest dany przez
zbiór $\{n_n\} = (n_1, n_2, \dots)$ liczb obsadzeń
kwazicząstek w danym stanie o energii
 $\hbar \omega_n$.

Fonony są wzbuđeniem kolektywnym
wielu różnych atomów w sieci
kryształowej. Efektywny opis za
pomocą kwazicząstek jest zdecydowanie
łatwiejszy niż rozwiązanie czystego
problemu N-ciałowego w I kwantyzacji.

Gdy $\hbar \rightarrow 0$, wtedy $\omega_k \rightarrow 0$ są to
tak zwane wzbudzenia bezmasowe,



W ogólności fony
dla kryształu 3D
mogą mieć 3 różne
polaryzacje (2 poprzeczne
i jedna podłużna), wtedy

$$\hat{H} = \sum_{k,\lambda} \hbar \omega_{k,\lambda} \left(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{polaryzacja}}}{a_{k,\lambda}^\dagger a_{k,\lambda}} + \frac{1}{2} \right)$$

Uwaga: fotony posiadają tylko dwie
polaryzacje (brak drgan
podłużnych)

Fotony mogą oddziaływać z elektronami,
co pozwala zrozumieć takie zjawiska
jak termiczne rozpraszanie elektronów
(opór elektryczny) oraz nadprzewodnictwo
(związane z elektrycznym przyciąganiem

powierchy elektronami, które jest modyfikowane przez fonony).

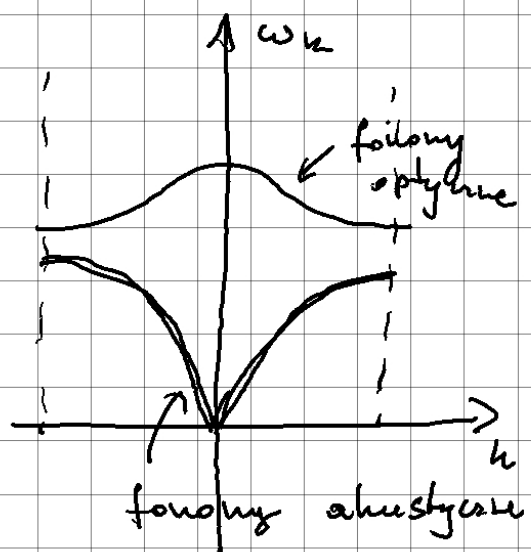
Fonony dzielimy na fonony akustyczne i optyczne:

- fonony akustyczne

$$\lim_{k \rightarrow 0} \omega_k \sim v k$$

- fonony optyczne

$$\lim_{k \rightarrow 0} \omega_k \sim \text{const} \neq 0$$



Dla kryształu zawierającego $N (> 2)$

różnych atomów w komórce prymitywnej relacja dyspersji posiada 3 gałęzie akustyczne oraz $3N - 3$ gałęzie optyczne.

Pomiary relacji dyspersji fononów

można wykonać np. rozpraszaniem

neutronów lub rozpraszaniem prom. X